

спина вверх или вниз) преимущественно реализуются при больших абсолютных значениях s-d обменного взаимодействия.

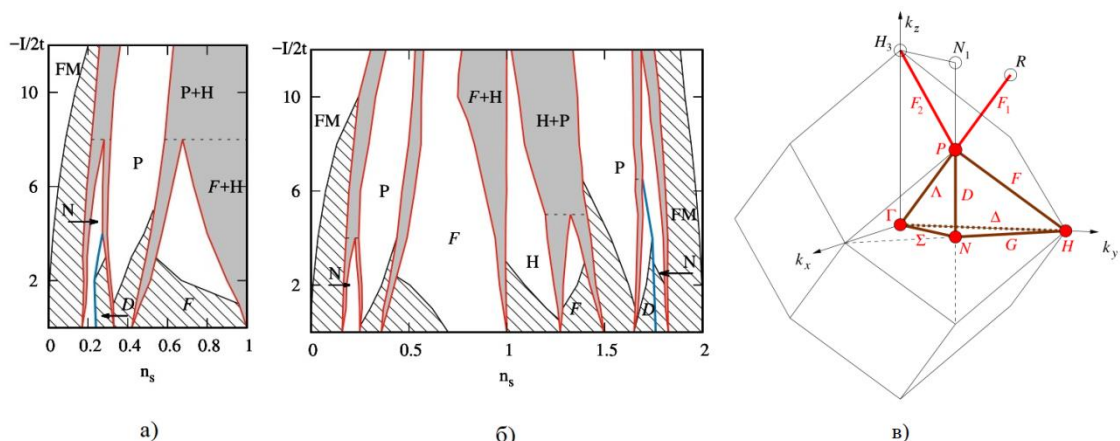


рис.1. Фазовая диаграмма основного состояния ОЦК решетки в переменных  $n_s$ — $I$  в приближении ближайших соседей (а), в приближении следующих за ближайшими соседями для  $t_2=0.2t$  (б). Толстой(синей) линией указаны фазовые переходы второго рода, тонкой (красной)— первого рода. Закрашенные серым области — области фазового расслоения, заштрихованные — области ненасыщенных состояний. Волновые векторы АФМ и спиральных фаз обозначены стандартным способом. Первая зона Бриллюэна ОЦК решетки (в).

Расчеты в рамках модели Хаббарда в аналогичном приближении [2] в случае большого числа носителей дают результаты, которые качественно близки к полученным в работе: обнаруженные магнитные состояния и типы фазовых переходов между ними оказываются одинаковыми, однако наличие локальных моментов, рассматриваемых в s-d модели, стабилизирует ферромагнитный порядок при малом числе носителей тока даже при малых ( $-I$ ).

Полученные результаты могут быть применены для объяснения свойств магнитных полупроводников и соединений, содержащих ионы редкоземельных металлов/

Список публикаций:

[1] Гуденаф Дж. // Магнетизм и химическая связь. М.:Металлургия. 1966.

[2] Igoshv P. A. et al // J. Phys.: Condens. Matter. 2015. Vol. 27. P. 446002.

## Орбитальный отклик монослойной сурьмы во внешнем магнитном поле

Пушкарев Георгий Владимирович

Яковлев Илья, Прищенко Данил, Мазуренко Владимир В., Мазуренко Владимир Гаврилович,

Руденко Александр Николаевич

Уральский федеральный университет

Мазуренко Владимир Гаврилович д.ф.-м.н., Руденко Александр Николаевич к.ф.-м.н.

[puskarev.g.v@gmail.com](mailto:puskarev.g.v@gmail.com)

Двумерные материалы привлекают внимание ученых со всего света благодаря особенностям физических свойств возникающих в них. Монослойная модификация сурьмы - одна из поздних представителей данного класса материалов и обладает хорошей стабильностью, непрямой зонной щелью, а также обладает сильным спин-орбитальным взаимодействием, что усиливает необходимость систематического исследования её магнитных свойств.

Одним из способов выяснения магнитных свойств материала является численное моделирование, которое ввиду развития компьютерных мощностей в современном обществе выходит на первый план. Для данных целей мы рассчитали магнитную восприимчивость двумерной сурьмы с использованием tight-binding (ТВ) приближения при учете спин-орбитального взаимодействия, которое позволяет значительно сократить трудозатратные расчеты с одной стороны и сохранить интересную физику явлений возникающих в сурьме с другой [1]. Магнитная восприимчивость в присутствии спин-орбитального взаимодействия в рамках ТВ модели может быть расписана следующим образом:

$$\chi_{total} = \chi_{orb} + \chi_{spin}, \quad (1)$$

Где,  $\chi_{spin}$  – спиновая часть магнитной восприимчивости, данная величина может быть рассчитана в рамках теории парамагнетизма Паули и пропорциональна плотности состояний  $g(E)$  на уровне Ферми :

$$\chi_{spin} \approx \mu_0 \mu_B g(E_F), \quad (2)$$

$\mu_0$  – магнитная проницаемость вакуума,  $\mu_B$  – магнетон Бора. Второй член уравнения (1), который обозначает орбитальный вклад в восприимчивость может быть в свою очередь получен в рамках "современной теории орбитальной намагниченности" с помощью средств теории Возмущений с использованием функций Грина [2]:

$$\chi_{orb} = -\frac{\mu_0 e^2}{12\hbar\pi S} \text{Im} \int_{-\infty}^{+\infty} n_F(E, T) * \text{Tr}[U_k(E) - 4V_k(E)] dE$$

$$U_k(E) = Gh^{xx}Gh^{yy} - Gh^{xy}Gh^{xy}, V_k(E) = Gh^xGh^xGh^yGh^y - Gh^xGh^yGh^xGh^y \quad (3)$$

В данной формуле  $n_F(E, T)$  – распределение Ферми-Дирака,  $\text{Tr}$  – операция взятия следа матрицы,  $h^{\alpha\beta}$  и  $h^\alpha$  соответственно вторая и первая производные от матрицы гамильтониана (соответствующие им матрицы) по компонентам вектора обратной решетки  $k_\alpha$  и  $k_\beta$ . Все производные рассчитывались аналитически следующим образом:

$$h^{\alpha\beta} = \frac{dH(\mathbf{k})}{dk_\alpha dk_\beta} = \sum_j \{H(\mathbf{r}^j)(ir_\alpha^j)(ir_\beta^j)e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}^j)}\} \quad (4)$$

Где  $H(\mathbf{r}^j)$  – гамильтониан в прямом пространстве, а  $r_\alpha^j$  – это  $\alpha$  компонента вектора  $\mathbf{r}^j$  соответствующего - му атому.  $G$  в формуле (3) представляет собой Функции Грина которые задавались следующим образом:

$$G(E, \mathbf{k}, \delta) = (E - H(\mathbf{k}) - i\delta)^{-1} \quad (5)$$

Где  $\delta$  – параметр размытия, который используется в численных расчетах с целью избежать обращения в бесконечность компонент матрицы функций Грина. В наших расчетах мы использовали следующие значения параметров: температура  $T = 10K$ , параметр размытия  $\delta = 0.001 \text{ eV}$ . Мы также используем специальную шкалу для представления результатов, которая выражается в единицах  $\chi_o = \mu_0 e^2 \hbar^{-2} a t^2$  со значениями  $a = 4.12 \text{ \AA}$  и  $t = 2.09 \text{ eV}$ , что соответствует  $\chi_o \cong 164.97 \times 10^{-5} \text{ \AA}$ .

Полученные результирующие графики зависимостей орбитальной восприимчивости монослойной сурьмы в ТВ приближении при учете спинорбитального взаимодействия изображены на (рис.1).

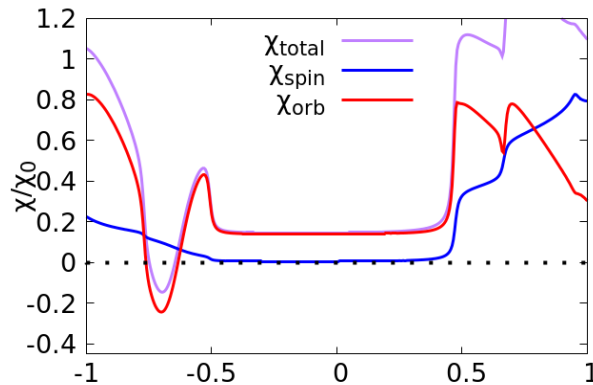


рис.1. Зависимость полной (фиолетовая линия), орбитальной (красная линия), спиновой (синяя линия) магнитных восприимчивостей двумерной сурьмы от значения уровня ферми (допирования).

Как можно видеть из графика полной орбитальной восприимчивости наблюдается положительный по знаку отклик, что является существенным отличием монослойной модификации сурьмы от её трехмерного вида, поскольку в случае объемного кристалла сурьма проявляет диамагнитные свойства [3, 4]. Следующую особенность можно увидеть в области допирования дырками  $\sim -0.65 \text{ eV}$ , в данной области наблюдается смена характера восприимчивости, что позволяет контролировать магнитные свойства материала посредством допирования.

Список публикаций:

- [1] A. N. Rudenko, M. I. Katsnelson, and R. Rold'an, *Phys. Rev. B* 95, 081407 (2017)
- [2] A. Raoux, F. Pi'echon, J.-N. Fuchs, and G. Montambaux, *Phys. Rev. B* 91, 085120 (2015).
- [3] R. C. Weast, M. J. Astle, and W. H. Beyer, *CRC Handbook of chemistry and physics: a ready-reference book of chemical and physical data*; 64e ed. (CRC Press, Boca Raton, Fla. (USA), 1984).
- [4] P. Selwood, *Magnetochemistry* (Read Books Limited, 2013).